

Modelování reaktivního transportu pro návrh technologie sanace

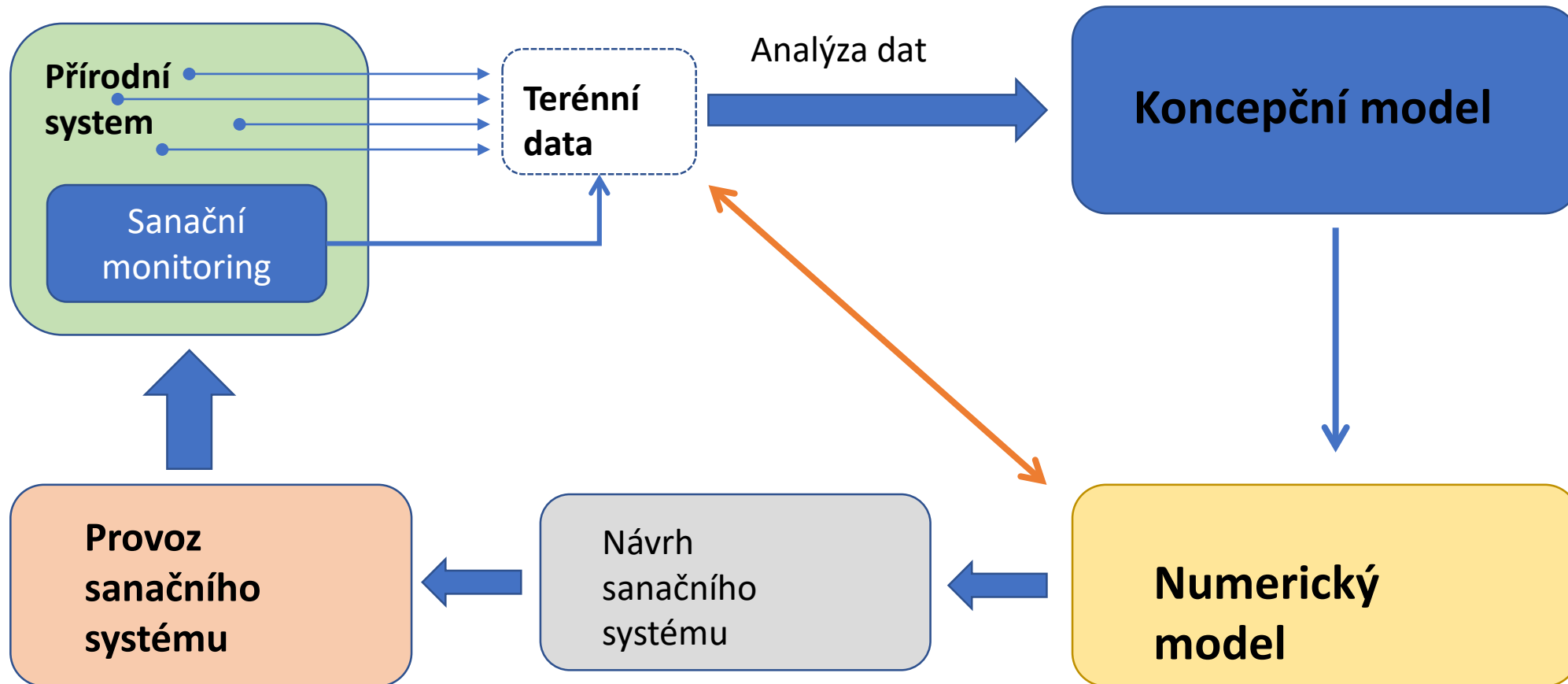
Zbyněk Vencelides

Ochrana podzemních vod, s.r.o.

Modelování reaktivního transportu

- Vždy se jedná o zjednodušení (aproximaci) reálného přírodního systému
- Simulace proudění podzemní vody, transportu rozpuštěných látek a jejich vzájemných interakcí s různou komplexností:
 - Jednoduché empirické modely (MT3DMS)
 - Zjednodušená vzájemná interakce jednotlivých složek (RT3D, SEAM3D)
 - Komplexní hydrochemické reakce, včetně komplexace rozpuštěných složek, acidobazických a redoxních dějů a heterogenních reakcí (PHT3D, PHAST, MIN3P...)
- Zásadní rozdíl – náročnost na vstupní data a na úroveň porozumění simulovanému systému

Modelování sanačního zásahu



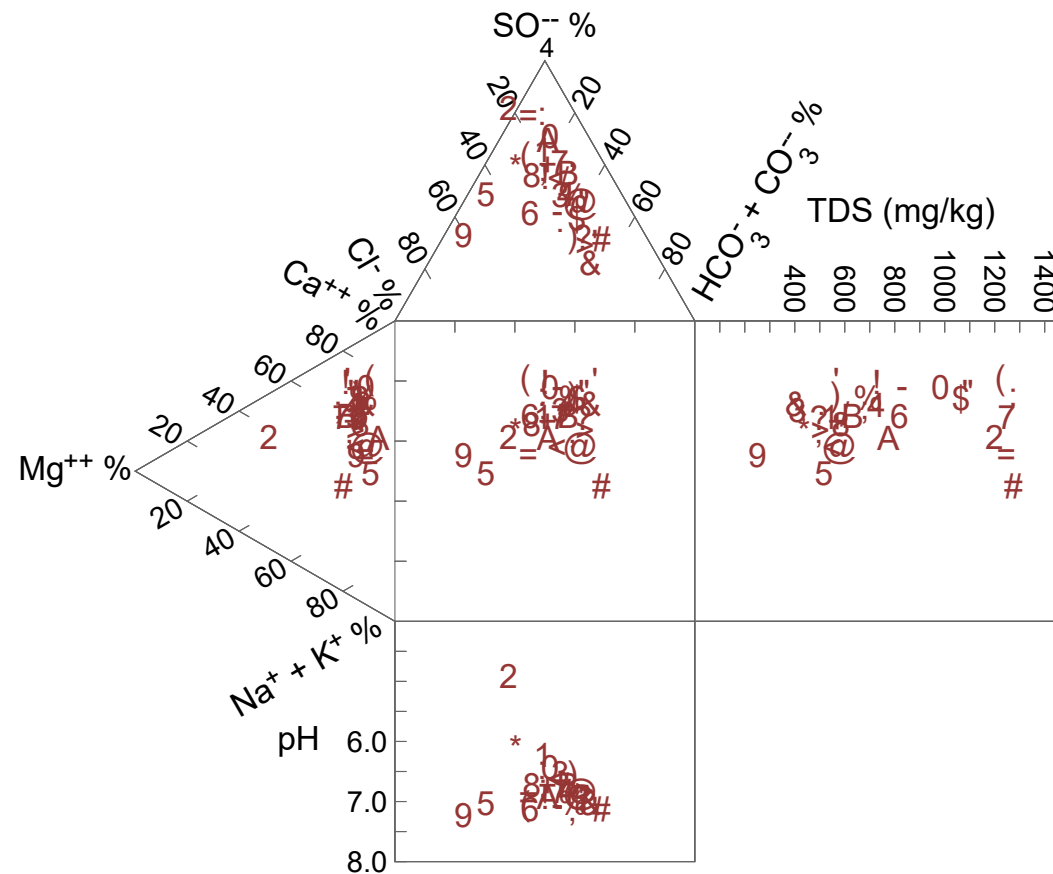
Příklad - model bioremediace As

- Cílem modelu bylo posoudit realizovatelnost a možné vedlejší a nežádoucí interakce během biologicky zprostředkované imobilizace As v mělkém kolektoru podzemní vody
- Výchozí návrh sanace spočíval v aplikaci zdroje organického uhlíku a síranu železnatého k navození sulfát redukčních podmínek v mělkého kolektoru a vazbu rozpuštěného As ve formě sulfidů, vysrážených v horninovém prostředí v tuhé fázi

Výchozí podmínky

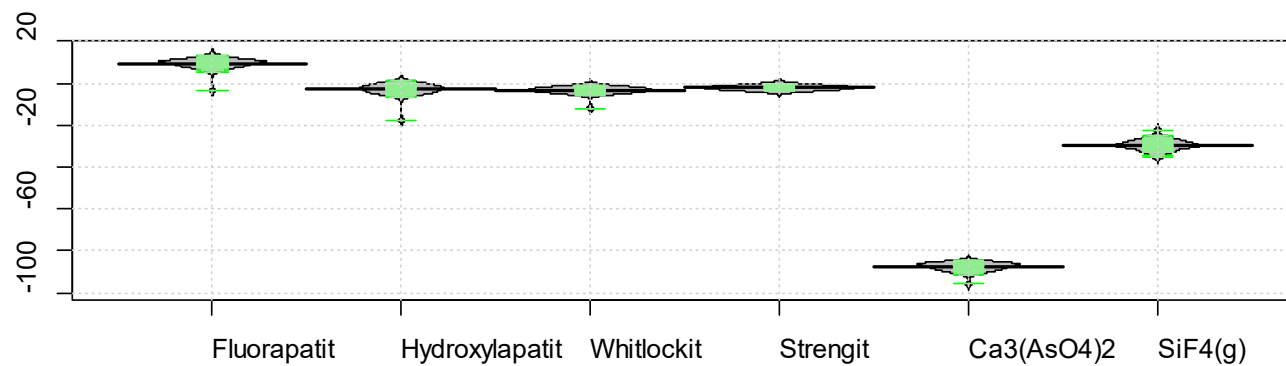
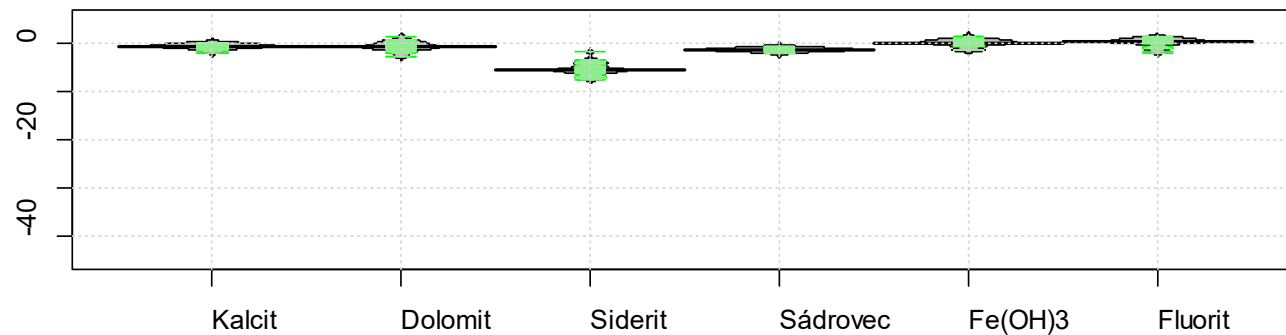
- Oxidační podmínky v kolektoru (měřitelný obsah rozpuštěného kyslíku a dusičnanů)
- Koncentrace As v desítkách $\mu\text{g/l}$
- Malá mocnost kolektoru (první jednotky m)
- Relativně vysoká rychlost proudění podzemní vody (0,X m za den)
- Otázky
 - Bude navržený způsob sanace v daných podmínkách fungovat?
 - Existuje riziko ovlivnění domovních studní ve vzdálenosti cca 90 m od místa aplikace??

Analýza hydrogeochemických podmínek

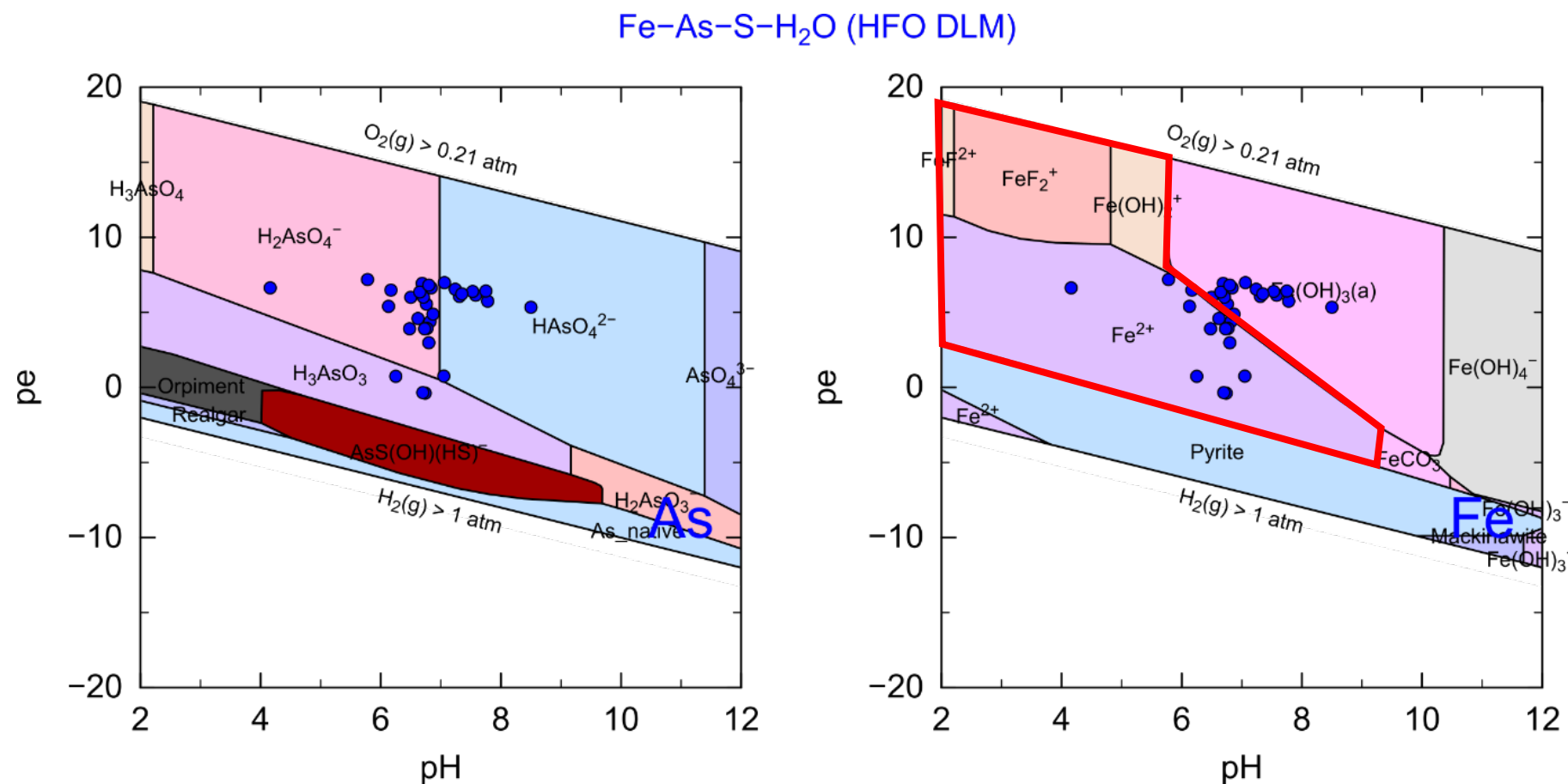


Saturační indexy vytipovaných fází

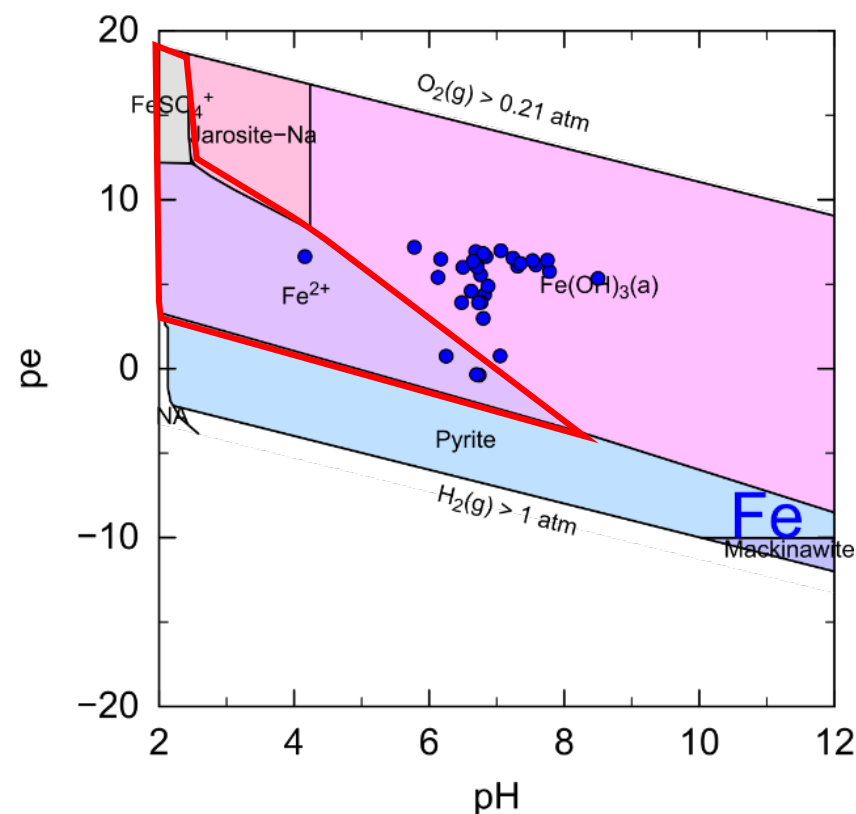
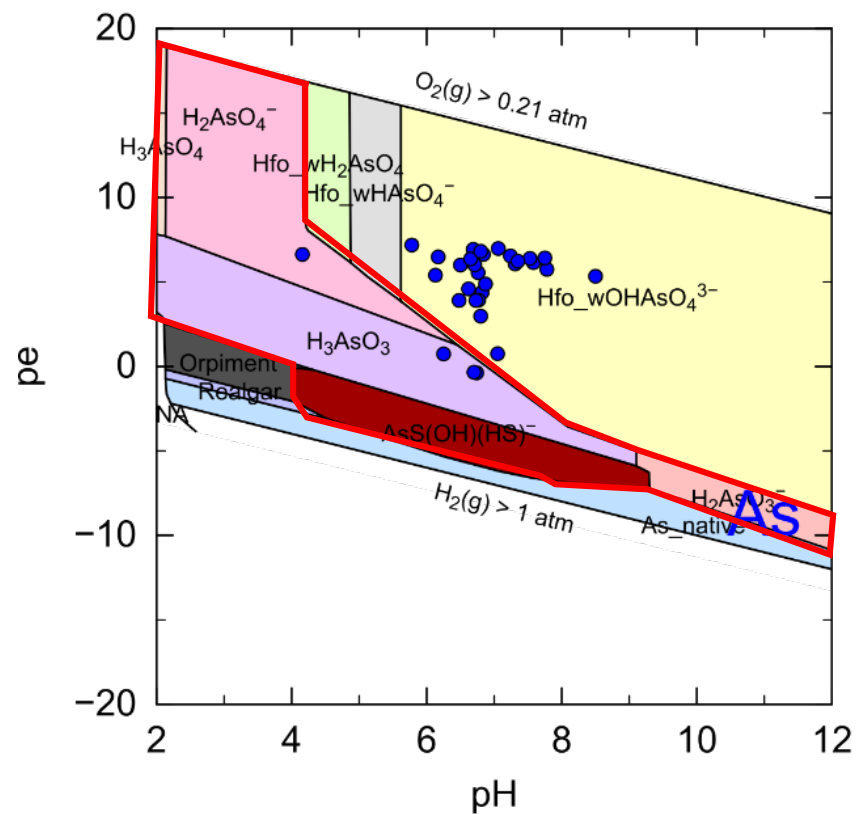
11.7.2022



Graf převažujících forem As a Fe (1)



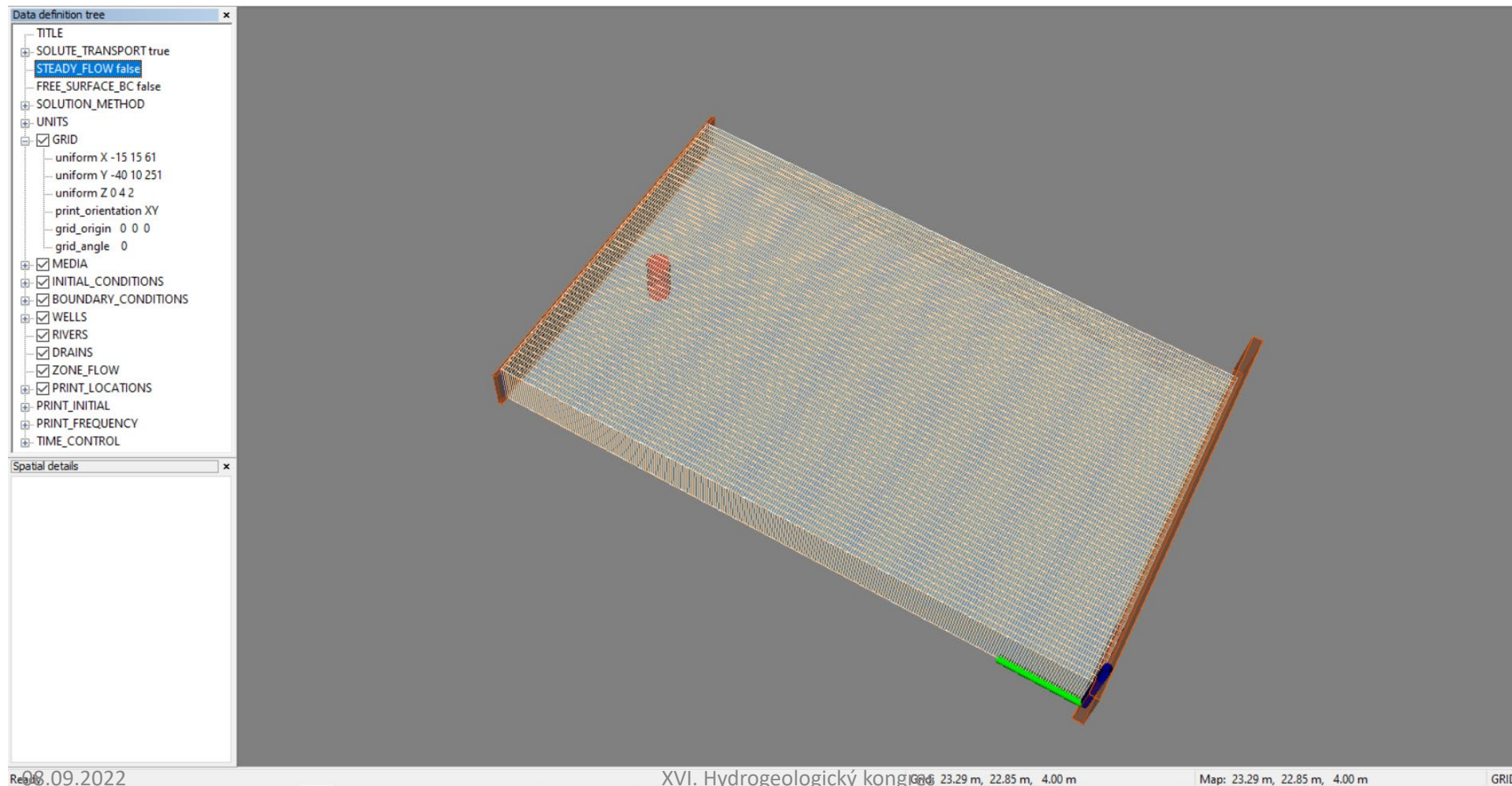
Graf převažujících forem As a Fe(II)

Fe-As-S-H₂O (HFO DLM)

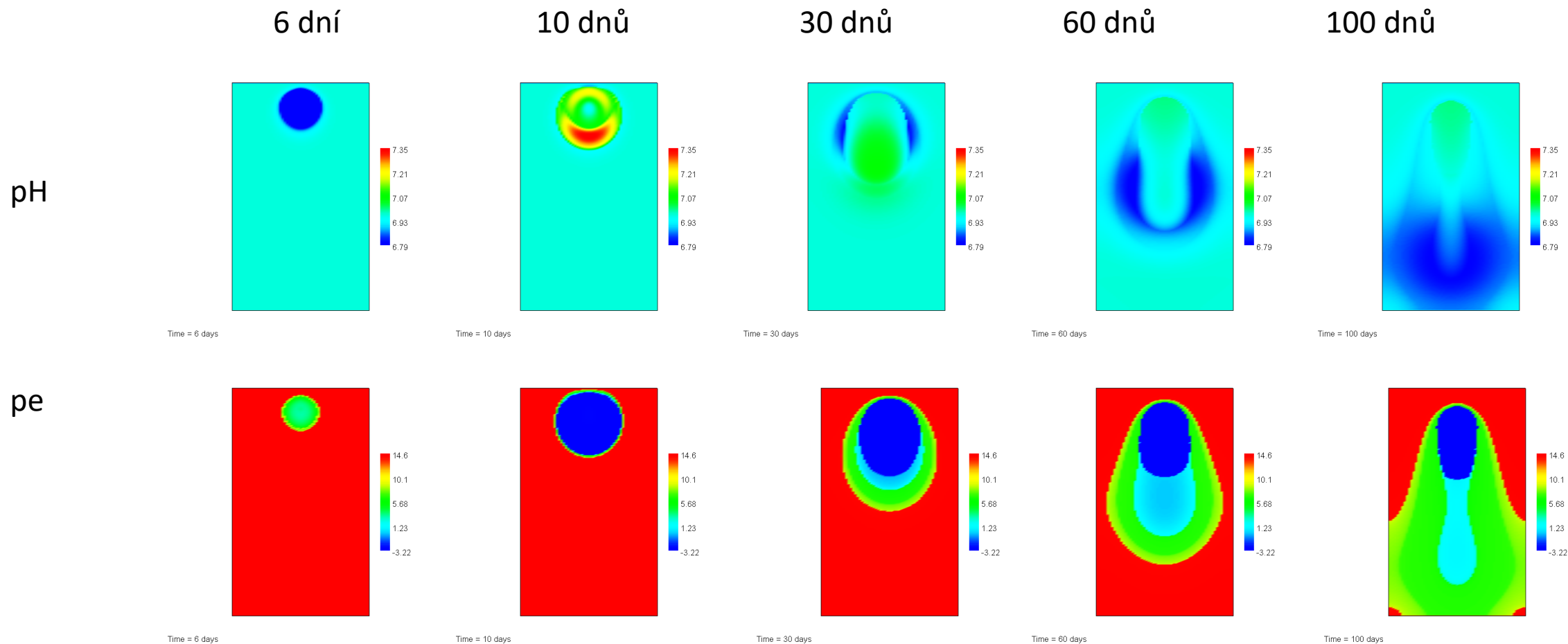
Simulované procesy

- Proudění podzemní vody v neustáleném stavu a transport látek
 - Injektáž imobilizačních činidel
 - 2. den syrovátka (laktát + $\text{Ca}(\text{OH})_2$)
 - 5. den FeSO_4
 - 30. den syrovátka (laktát + $\text{Ca}(\text{OH})_2$) + FeSO_4
- Biodegradace syrovátky
 - Růst biomasy SRB jako funkce koncentrace substrátu a N
 - Rychlost rozkladu laktátu jako funkce obsahu biomasy a síranů
 - Neúplný rozklad laktátu v sulfát redukčních podmínkách na acetát
- Rozpouštění a srážení fází
 - **Ferrihydrit**, mackinawit, realgar, kalcit, odplynění CO_2
- Povrchová komplexace As na Hfo (ferrihydrit)

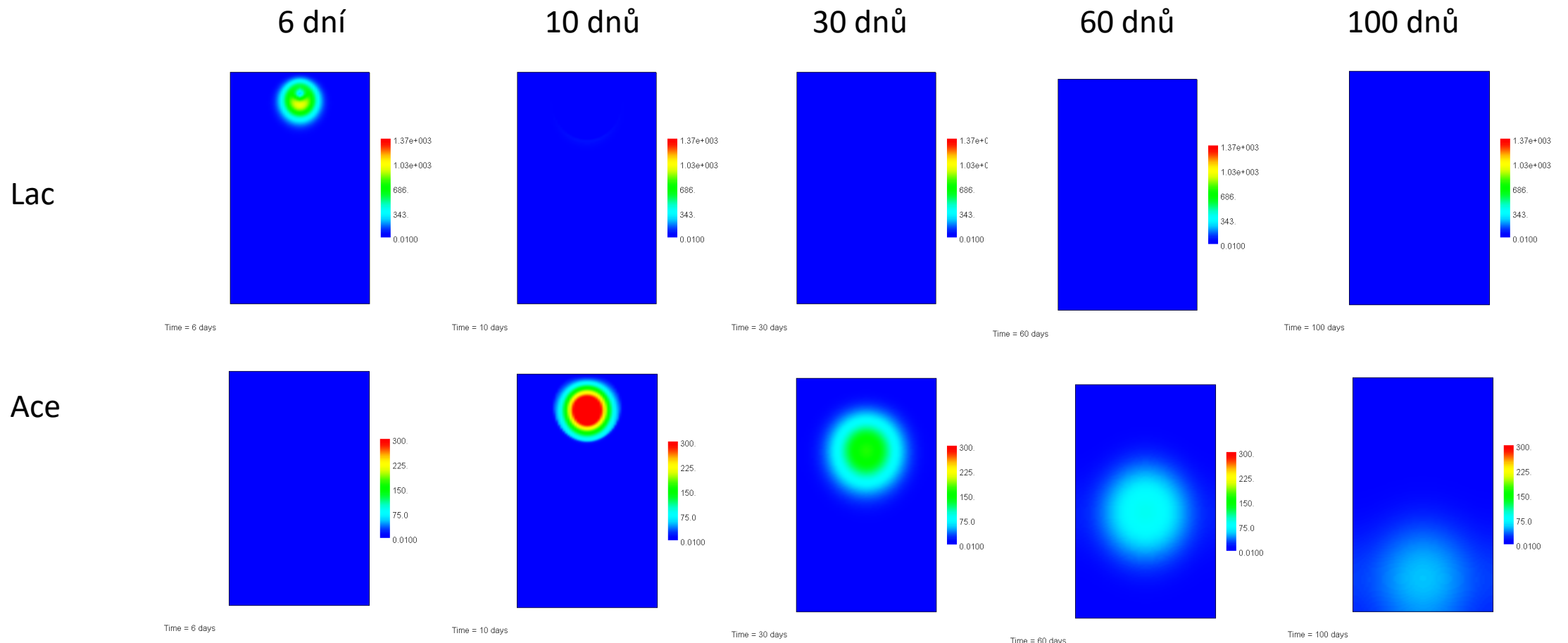
Modelová doména



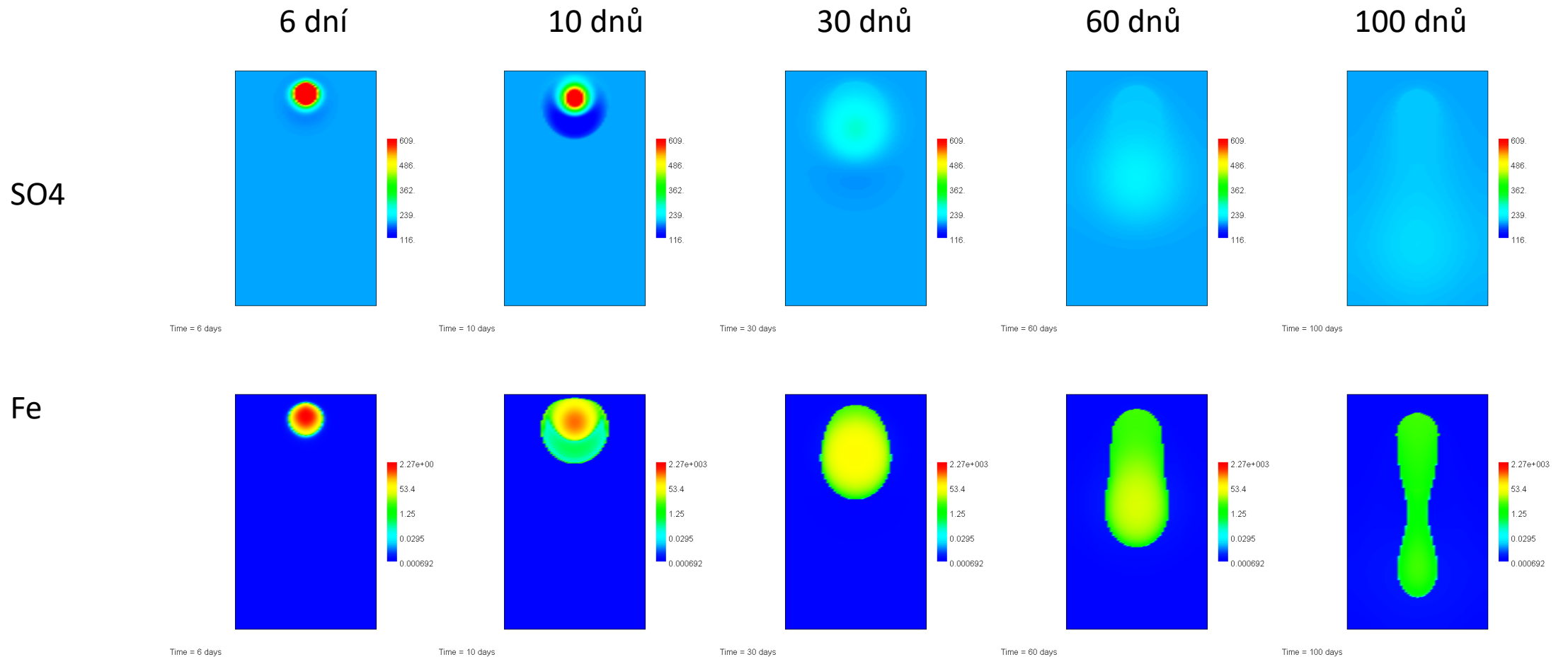
Výsledky modelu pH a pe



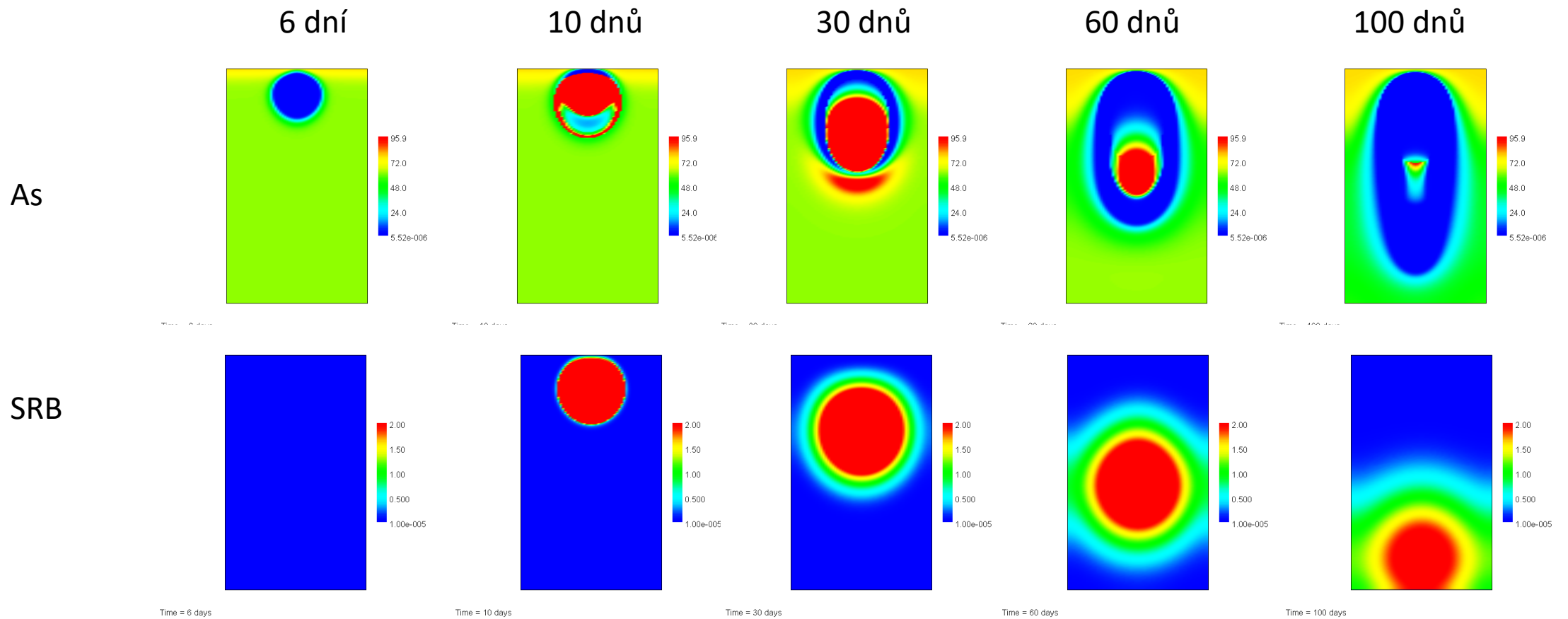
Výsledky modelu Laktát a Acetát



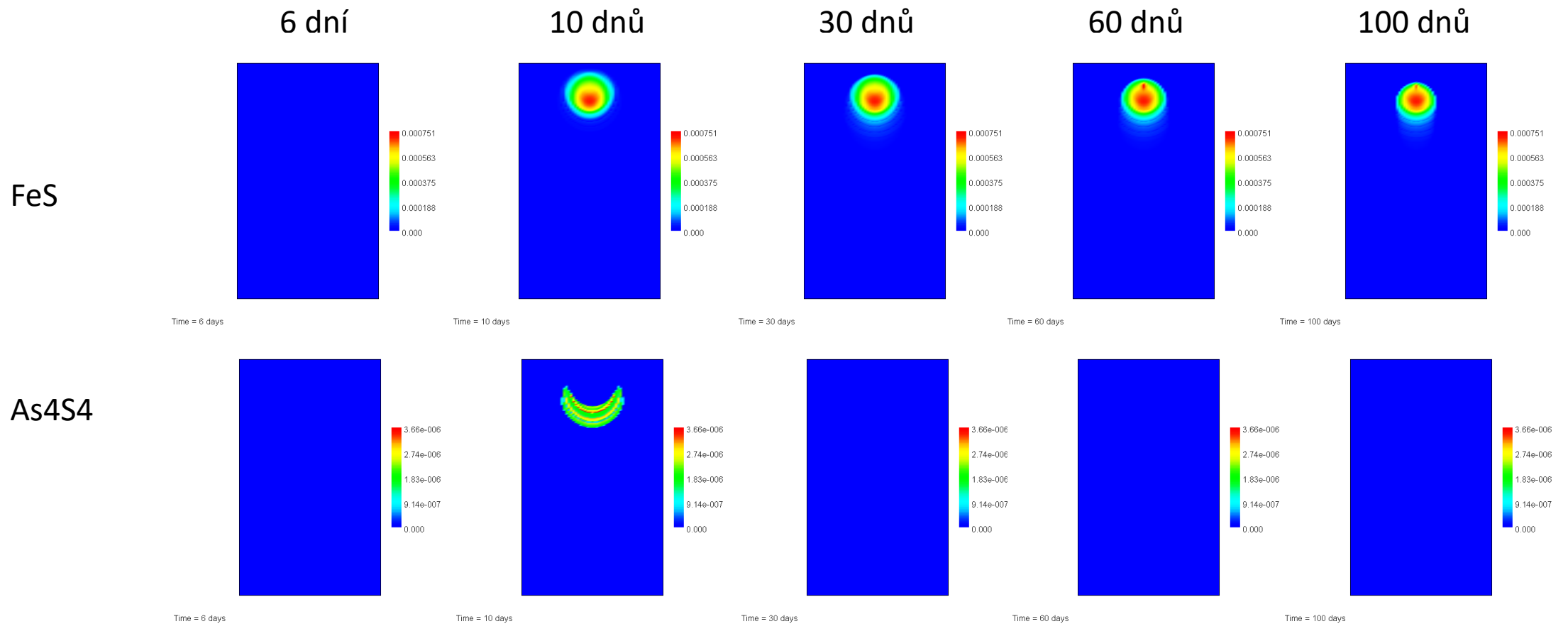
Výsledky modelu Sírany a Železo



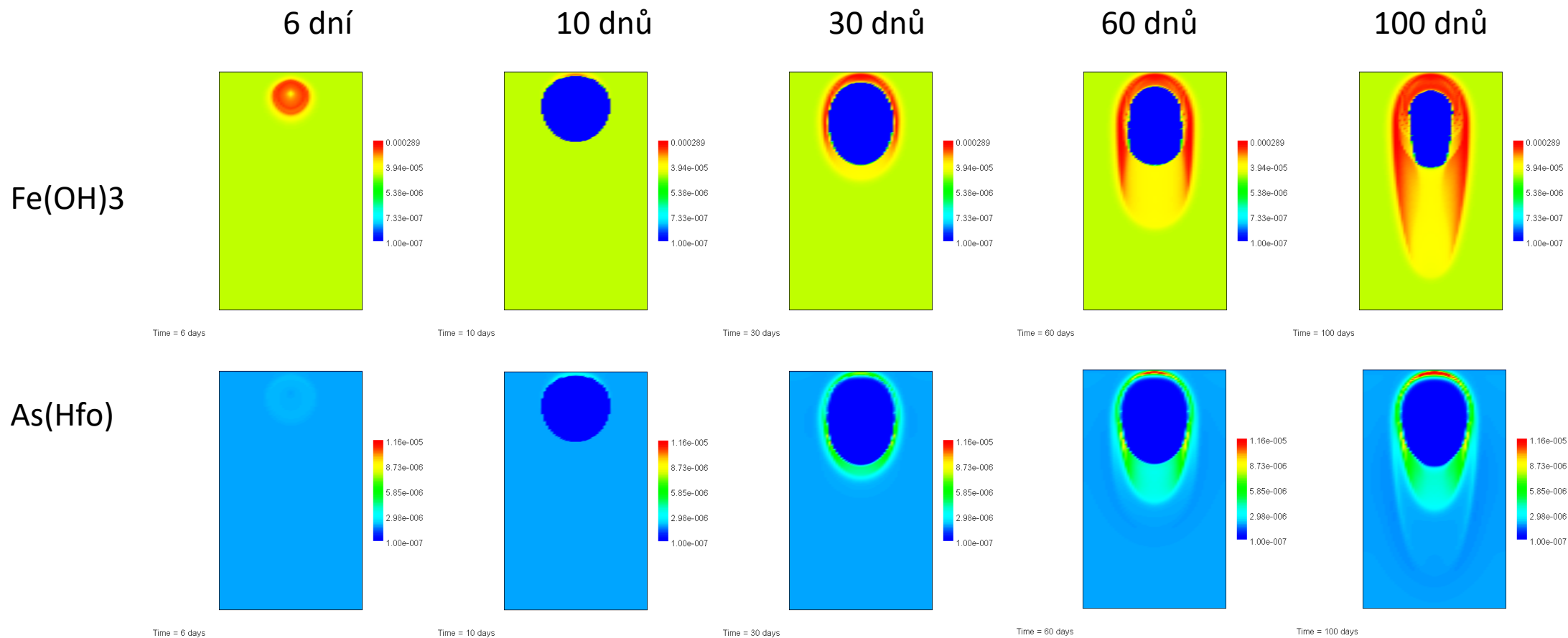
Výsledky modelu Arsen a SRB



Výsledky modelu Mackinawite a Realgar



Výsledky modelu Ferrihydrit a As(Hfo)



Shrnutí výsledků

- Intenzita vtláčení činidel určuje jejich distribuci – možnost uplatnění píštového efektu
- Aplikovaná činidla mohou být poměrně rychle vymývána z místa aplikace
 - Bude nutná dlouhodobá aplikace
 - Udržitelnost bude omezená v případě pokračujícího uvolňování As ze zdroje
- Klíčovým procesem imobilizace z dlouhodobého hlediska bude pravděpodobně povrchová komplexace As na hydroxidech železa (Hfo)
- Redukce primárních hydrooxidů železa může vyústit v dílčí mobilizaci As, vázaného na Hfo
- Výsledky sanace budou záviset na přítomnosti kalcitu a hydrooxidů železa v kolektoru

Závěry

- Simulace reaktivního transportu umožňují
 - Identifikovat klíčové procesy v daném systému
 - Identifikovat potenciální vedlejší a nežádoucí efekty
 - Testovat uplatnění jednotlivých procesů za různých podmínek
 - Ověřit dlouhodobou udržitelnost použité metody
 - Navrhnout variantní řešení
 - Složení aplikovaných reaktivních složek
 - Způsob jejich aplikace

Děkuji za pozornost